

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ АНИЗОТРОПИИ УПРУГИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ

Замковская А.И., Максимова Е.М.

Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, г. Симферополь, *trabem.z@gmail.com*

Информация о глубинах Земли поступает к нам главным образом в виде скоростей сейсмических волн из геофизических данных. Для того чтобы построить адекватную минералогическую модель строения Земли, необходимо знать свойства отдельных породообразующих минералов. Изучение упругих свойств остается на сегодняшний день сложной и актуальной задачей в области минералогии, физической химии, физики твердого тела, [Кантор, 2007].

Целью данной работы было исследование и визуализация анизотропии упругих свойств кристаллов.

Под действием напряжения форма твердого тела изменяется. При достаточно малых напряжениях деформация пропорциональна величине приложенного напряжения. Согласно закону Гука:

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijlm} \sigma_{lm} \quad (1)$$

Справедлив и обратный закон

$$\sigma_{ij} = C_{ijlm} \varepsilon_{lm} \quad (2)$$

В формулах (1) и (2) S_{ijlm} – тензор коэффициентов упругой податливости, а C_{ijlm} – тензор коэффициентов упругой жесткости, [Максимова, 2002]. В развернутом виде уравнения (1) и (2) представляются девятью уравнениями с 81 коэффициентами S и C . Совокупность ($S_{ijlm} C_{ijlm}$) образует тензор четвертого ранга. Поскольку тензоры деформаций и напряжений – симметричные тензоры второго ранга (т.е. $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$), то независимых компонент в S и C будет не 81, а только 36.

Для сокращения числа индексов вводят так называемые матричные обозначения, согласно которым пары индексов заменяются однократными:

$$11 \rightarrow 1; 22 \rightarrow 2; 33 \rightarrow 3; \left. \begin{matrix} 23 \\ 32 \end{matrix} \right\} \rightarrow 4; \left. \begin{matrix} 13 \\ 31 \end{matrix} \right\} \rightarrow 5; \left. \begin{matrix} 12 \\ 21 \end{matrix} \right\} \rightarrow 6$$

В таком обозначении S и C уже не являются тензорами, а представляют из себя квадратную матрицу 6-го порядка. Компоненты этих матриц удовлетворяют условию симметрии $C_{mn} = C_{nm}$ и $S_{mn} = S_{nm}$, [Александров, 2000]. Из этого условия следует, что из 36 упругих постоянных лишь 21 является в общем смысле независимыми. Число независимых компонент уменьшается с повышением симметрии. Так, в среде кубической симметрии число независимых постоянных всего три.

Для наглядного представления анизотропии свойств и точного определения величины свойства

вдоль произвольного направления удобно использовать указательную поверхность, радиус-векторы которой характеризуют относительные величины свойства в данном направлении. Для коэффициента упругой податливости и коэффициента упругой жесткости уравнение указательной поверхности имеет следующий вид:

$$S_n = S_{ijkl} n_i n_j n_k n_l \quad (3)$$

$$C_n = C_{ijkl} n_i n_j n_k n_l \quad (4)$$

где n – проекции единичного вектора направления на оси координат, выбранные в соответствии с кристаллофизическими правилами установки.

Для создания трехмерных, вращающихся моделей указательных поверхностей удобно использовать пакет прикладных программ MathCad. Большие математические возможности этого пакета делают его удобным инструментом физических исследований.

В рамках этого пакета была написана программа, позволяющая строить указательные поверхности упругих коэффициентов. Программа позволяет определить максимальное и минимальное значение упругих свойств, определить их симметрию и анизотропию.

Рассмотрим указательные поверхности упругих свойств на примере одного из самых распространенных минералов в земной коре – кварца. Кварц принадлежит к тригональной системе и к классу 32.

Классу симметрии кварца соответствует следующая матрица коэффициентов упругой жесткости:

$$C_{mn} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ C_{14} & -C_{14} & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & C_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{14} & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{pmatrix},$$

где $C_{11}=84.84$ ГПа, $C_{12}=5.32$ ГПа, $C_{13}=12.24$ ГПа, $C_{14}=-17.66$ ГПа, $C_{33}=105.44$ ГПа, $C_{44}=57.55$ ГПа, при температуре $T=300$ К, [de Boer, 1996].

На рисунке 1 и 2 представлены указательные поверхности коэффициента упругой податливости и коэффициента упругой жесткости кварца. Форма и ориентировка указательных поверхностей упругих свойств кварца относительно кристаллической си-

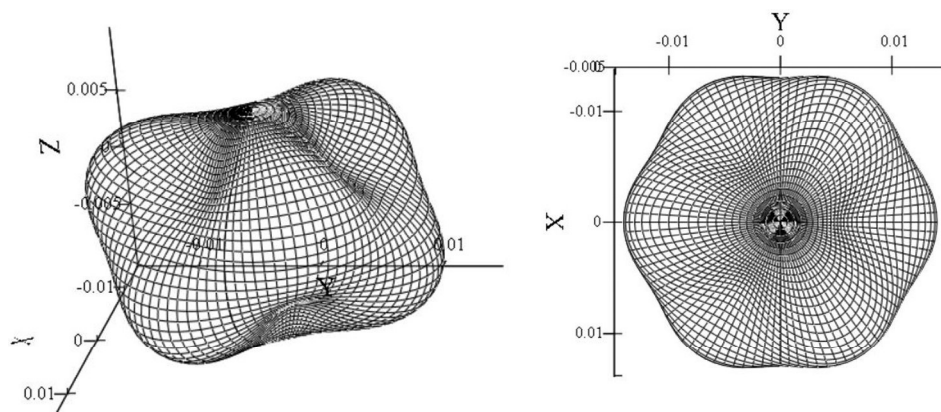


Рис. 1. Указательная поверхность коэффициента упругой податливости S кварца и ее проекция на координатную плоскость XOY

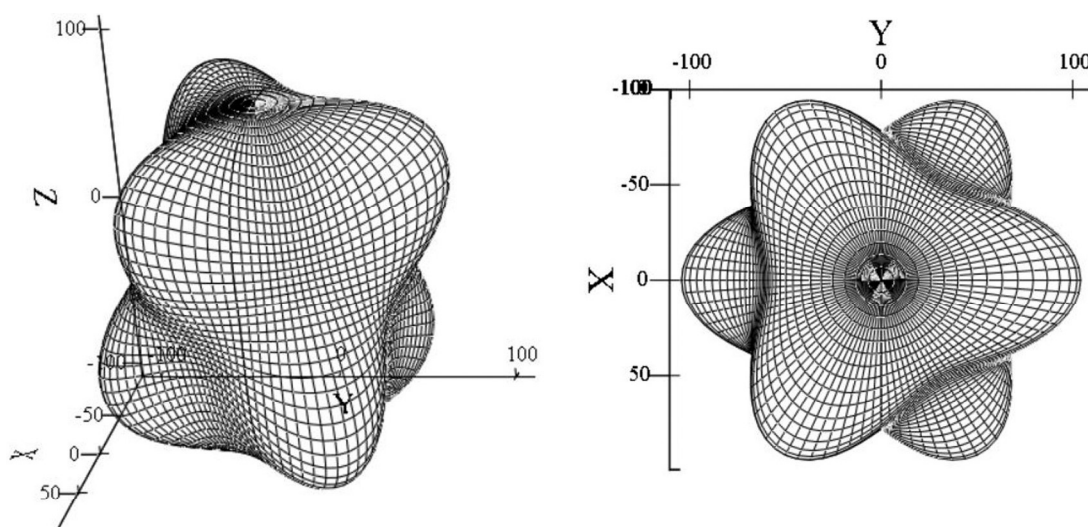


Рис. 2. Указательная поверхность коэффициента упругой жесткости C кварца и ее проекция на координатную плоскость XOY

стемы координат зависит от симметрии кристалла и описывается классом симметрии $3m$ в соответствии с принципом Неймана: симметрия кристаллического свойства должна включать в себя элементы симметрии самого кристалла.

ЛИТЕРАТУРА

1. Александров К.С., Продайвода Г.Т. Анизотропия упругих свойств минералов и горных пород. СО РАН, 2000, 347 с.
2. Кантор А.П. Изучение упругих свойств минералов при высоких давлениях и температуре на примере вюститита и железо-никелевого сплава // Диссертация на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук, Москва, 2007. 169 с.
3. Максимова Е.М. Тензорные свойства кристаллов. // Метод. пособие для практических занятий по курсу «Кристаллофизика», Симферополь, ТНУ. 2002. 23 с.
4. de Boer K., Jansen A.P.J., van Santen R.A., Watson G.W., Parker S.C. Free-energy calculations of thermodynamic, vibrational, elastic, and structural properties of α -quartz at variable pressures and temperatures // *Condens. Matter*, 1996, 54, p. 826-835.